

Table 35. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) for (IMes)(PCy₃)Cl₂Ru=C(H)OEt (11). The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Ru	362(1)	279(1)	257(1)	-9(1)	6(1)	-16(1)
P	350(4)	301(4)	263(3)	-4(3)	16(4)	-36(4)
Cl(1)	582(5)	403(4)	347(4)	9(3)	-10(4)	66(4)
Cl(2)	472(5)	411(5)	393(5)	-13(4)	-12(4)	64(4)
N(1)	348(15)	454(14)	296(13)	-91(10)	-24(12)	-68(12)
N(2)	456(14)	417(16)	307(14)	-74(12)	36(11)	-60(14)
O	572(14)	508(15)	572(16)	28(12)	43(12)	-162(13)
C(1)	399(16)	298(16)	332(15)	43(14)	-4(12)	14(14)
C(2)	630(30)	880(30)	271(18)	-168(17)	38(17)	-210(20)
C(3)	620(20)	890(30)	286(17)	-210(20)	158(16)	-250(20)
C(4)	424(18)	410(20)	253(18)	-78(14)	59(14)	-117(16)
C(5)	482(18)	420(20)	382(16)	-32(16)	108(13)	-55(18)
C(6)	440(20)	780(30)	410(20)	70(20)	68(19)	7(18)
C(7)	540(20)	760(30)	358(19)	-100(20)	61(19)	-300(20)
C(8)	800(30)	450(20)	360(20)	-123(17)	191(19)	-230(20)
C(9)	520(20)	420(20)	271(17)	-34(15)	136(15)	-84(17)
C(10)	620(30)	530(30)	700(30)	40(20)	160(30)	90(20)
C(11)	700(40)	1170(50)	620(30)	-150(30)	-80(30)	-340(40)
C(12)	850(30)	460(30)	630(30)	90(20)	230(30)	40(20)
C(13)	344(18)	460(20)	308(17)	-99(15)	-42(14)	-43(16)
C(14)	350(17)	380(20)	430(19)	-120(15)	-102(15)	27(15)
C(15)	470(20)	370(20)	530(20)	-47(17)	-66(18)	-29(18)
C(16)	390(19)	500(20)	400(20)	-54(16)	-59(15)	-24(17)
C(17)	380(20)	480(20)	370(20)	-74(17)	-48(16)	119(18)
C(18)	520(20)	397(19)	291(18)	-61(14)	-88(15)	94(16)
C(19)	520(30)	440(20)	840(30)	-140(20)	-170(20)	80(20)
C(20)	440(30)	760(40)	810(40)	40(30)	-70(30)	-20(20)
C(21)	680(30)	480(30)	660(30)	10(20)	-190(30)	-20(20)
C(22)	570(20)	372(18)	269(16)	-39(16)	25(17)	-27(15)
C(23)	460(20)	750(30)	620(30)	30(20)	20(20)	-210(20)
C(24)	730(30)	520(30)	1430(50)	150(30)	90(40)	-300(30)
C(25)	380(20)	355(18)	327(16)	21(13)	-8(14)	-49(14)
C(26)	780(30)	720(30)	510(30)	300(20)	-270(20)	-310(30)
C(27)	1240(50)	520(20)	610(30)	290(20)	-460(30)	-470(30)
C(28)	620(30)	510(20)	440(20)	204(16)	0(20)	100(20)
C(29)	740(30)	560(30)	360(20)	100(19)	-210(20)	-10(20)
C(30)	810(30)	410(20)	390(20)	50(20)	-130(20)	-30(20)
C(31)	354(18)	330(20)	290(18)	-63(16)	1(15)	29(15)
C(32)	380(20)	380(30)	950(40)	-20(30)	90(20)	9(18)
C(33)	310(20)	540(30)	930(40)	0(30)	30(20)	-52(19)
C(34)	470(20)	620(30)	480(20)	-190(20)	103(19)	-220(20)
C(35)	620(30)	360(20)	580(30)	-10(20)	20(20)	-108(19)
C(36)	440(20)	480(20)	430(20)	52(18)	0(19)	-103(18)
C(37)	410(20)	310(20)	231(19)	21(15)	-18(15)	-21(15)
C(38)	470(30)	610(40)	870(40)	-380(30)	120(30)	-30(20)
C(39)	320(20)	630(30)	830(40)	-140(30)	10(20)	-30(20)
C(40)	500(20)	580(30)	570(30)	0(20)	150(20)	160(20)
C(41)	500(20)	670(30)	520(30)	-230(20)	10(20)	100(20)
C(42)	450(20)	570(30)	350(20)	-122(19)	-21(18)	40(19)
C(43)	780(40)	700(30)	690(30)	-120(30)	-20(30)	-40(30)
C(44)	800(40)	700(30)	850(40)	-190(30)	60(30)	250(30)

C(45)	820(40)	690(30)	980(40)	100(20)	110(30)	-80(30)
C(46)	610(30)	1190(40)	820(40)	-130(30)	70(30)	-240(30)
C(47)	790(40)	1010(30)	680(30)	40(20)	60(40)	-60(30)
C(48)	830(40)	710(30)	870(40)	100(30)	170(30)	-170(30)

Table 36. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for (IMes)(PCy₃)Cl₂Ru=C(H)OEt (11).

	x	y	z	U _{iso}
H(2)	50(30)	4461(13)	-2063(11)	51(8)
H(3)	1783(19)	5111(15)	-1853(12)	37(8)
H(6)	4652(19)	5040(13)	-201(11)	54(9)
H(8)	3370(20)	7061(14)	-453(11)	28(8)
H(10A)	2480(30)	3978(19)	-566(17)	82(15)
H(10B)	3620(20)	3966(16)	-450(13)	45(10)
H(10C)	3220(30)	4092(19)	-1147(17)	72(12)
H(11A)	5010(40)	6990(20)	0(20)	140(20)
H(11B)	5850(30)	6160(20)	-45(19)	92(17)
H(11C)	5380(30)	6431(17)	377(16)	75(13)
H(12A)	1370(30)	6750(20)	-1320(20)	117(17)
H(12B)	1500(40)	7260(30)	-760(20)	130(20)
H(12C)	640(30)	6686(19)	-680(17)	105(14)
H(15)	-2290(30)	2597(17)	-825(17)	64(13)
H(17)	-3910(20)	4497(14)	-1145(11)	39(8)
H(19A)	330(40)	3010(20)	-1130(20)	130(20)
H(19B)	-250(20)	2552(16)	-728(12)	52(10)
H(19C)	180(30)	3278(15)	-482(13)	68(11)
H(20A)	-4570(20)	3109(15)	-586(13)	47(12)
H(20B)	-4090(30)	2560(19)	-818(17)	77(14)
H(20C)	-4760(30)	3148(19)	-1220(16)	91(15)
H(21A)	-2900(30)	5590(20)	-1333(18)	80(15)
H(21B)	-1940(30)	5570(20)	-1740(20)	118(18)
H(21C)	-1890(30)	5625(18)	-1082(16)	46(13)
H(22)	-1960(20)	4786(13)	216(11)	49(8)
H(23A)	-2800(20)	3640(16)	186(15)	69(10)
H(23B)	-2910(30)	3860(20)	1085(18)	107(13)
H(24A)	-2050(30)	2440(20)	314(19)	130(17)
H(24B)	-2990(30)	2600(20)	877(19)	89(14)
H(24C)	-1670(50)	2760(30)	1180(30)	210(30)
H(25)	940(20)	4488(15)	1789(13)	43(10)
H(26A)	-800(30)	4050(20)	1552(17)	84(14)
H(26B)	-1130(20)	4337(15)	2146(13)	38(10)
H(27A)	370(30)	3190(20)	2090(20)	100(20)
H(27B)	-720(30)	3030(20)	2237(16)	71(12)
H(28A)	-460(30)	3820(20)	3166(17)	92(15)
H(28B)	360(20)	3200(16)	3161(13)	64(11)
H(29A)	1670(30)	3970(18)	2786(14)	72(12)
H(29B)	1160(30)	4300(16)	3340(15)	60(11)
H(30A)	220(30)	5112(16)	2761(13)	47(12)
H(30B)	1140(20)	5283(16)	2603(12)	36(9)
H(31)	1212(17)	6224(12)	1927(11)	10
H(32A)	2450(20)	5283(17)	1618(14)	47(10)
H(32B)	2410(20)	5571(16)	956(15)	60(11)
H(33A)	4000(30)	6050(20)	1680(20)	114(18)
H(33B)	3200(20)	6297(17)	2137(16)	54(11)
H(34A)	3450(20)	6907(16)	879(14)	53(10)
H(34B)	3770(20)	7306(13)	1466(11)	28(7)
H(35A)	2030(20)	7840(17)	1160(13)	53(10)
H(35B)	2000(20)	7511(14)	1751(14)	33(8)
H(36A)	470(20)	7050(13)	1153(11)	31(8)
H(36B)	1260(20)	6750(14)	772(12)	33(9)

H(37)	-1107(17)	6343(12)	1341(10)	0(6)
H(38A)	-2240(20)	5253(17)	1835(13)	44(12)
H(38B)	-2250(20)	5453(17)	1267(14)	26(11)
H(39A)	-3280(30)	6405(18)	1390(15)	39(13)
H(39B)	-3850(20)	5903(16)	1559(13)	38(9)
H(40A)	-3710(20)	6822(16)	2331(13)	48(9)
H(40B)	-3120(20)	6128(16)	2596(14)	59(10)
H(41A)	-2010(30)	7190(20)	2716(17)	93(13)
H(41B)	-1930(30)	7302(17)	2055(14)	45(12)
H(42A)	-1020(20)	6159(16)	2555(13)	45(10)
H(42B)	-460(20)	6723(14)	2256(12)	38(10)
H(43)	2670(40)	3550(30)	1630(20)	150(20)
H(44)	3990(50)	4330(30)	900(20)	160(30)
H(45)	5710(40)	4470(30)	960(20)	160(20)
H(46)	6360(40)	4110(30)	1910(20)	120(20)
H(47)	5520(30)	3470(20)	2645(18)	99(17)
H(48)	3640(30)	3200(20)	2509(19)	106(16)

Table 37. Selected torsion angles [°] for (IMes)(PCy₃)Cl₂Ru=C(H)OEt (11).

P-Ru-C(22)-H(22)	93.0(17)
------------------	----------